

Monte Carlo Method을 사용한 DME 합성 반응의 Kinetic Analysis 와 Simulation에 대한 연구

한의진, 안성준, 김형규¹, 서정철¹, 윤인섭*
서울대학교 응용화학부; ¹한국가스공사
(esyoon@pslab.snu.ac.kr*)

천연가스로부터 제조한 디메틸에테르 (Dimethyl Ether, 이하 DME) 에너지는 최근 수송 에너지로서 각광을 받고 있는데, 연료로서 천연가스의 물리 화학적 단점을 대부분 보완할 수 있는 특성을 갖추고 있어서 중요한 차세대 연료로서 주목 받고 있다.

DME제조공정은 메탄의 Reforming으로부터 합성된 Syngas로부터 Methanol을 합성하고 Methanol의 탈수반응을 통하여 DME가 생산되는 2단계 공정으로 되어 있으며 Methanol 합성용 촉매로는 상용 촉매와 같은 Cu/ZnO/Al₂O₃ 촉매를 사용하며 Methanol의 탈수의 촉매로는 γ -Al₂O₃을 사용하는 DME 제조반응을 대상으로 하였다. 본 연구에서는 Methanol 합성과 탈수 반응에 대하여 문헌에 제시되어 있는 DME의 heterogeneous reaction mechanism을 재검토 해보고 heterogeneous reaction에서 가장 좋은 결과를 보여주는 L-H (Langmuir-Hinshelwood) 모델을 적용하여 그 모델에서의 파라미터들을 DFT caculation (Density Functional Theory)를 통하여 유도해본다. 그 결과를 바탕으로 Monte Carlo Grand Canonical Ensemble을 통하여 촉매상에서의 분자들의 흡착, 반응, 탈착에 대한 모사를 실시하여 DME 합성 공정의 Kinetic 경향을 분석하였다. 이러한 모사는 촉매표면을 격자로 나누어 표면에서 Random Walk로 흡착, 확산, 반응 탈착하는 dynamic process를 나타내어 주며 이러한 모사의 결과를 실험을 통한 문헌치와 비교분석 하여 본다.